



PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **07306139 A**(43) Date of publication of application: **21 . 11 . 95**

(51) Int. Cl.

G01N 21/59
G01N 15/06
G01N 21/03

(21) Application number: **06123052**(22) Date of filing: **11 . 05 . 94**(71) Applicant: **KYOTO DAIICHI KAGAKU:KK**

(72) Inventor: **KUBO HIROKO**
JIYO KAKIN
UENOYAMA SEIZO

(54) **METHOD AND INSTRUMENT FOR MEASURING
 CONCENTRATION OF COMPONENT, ETC., OF
 LIQUID SAMPLE**

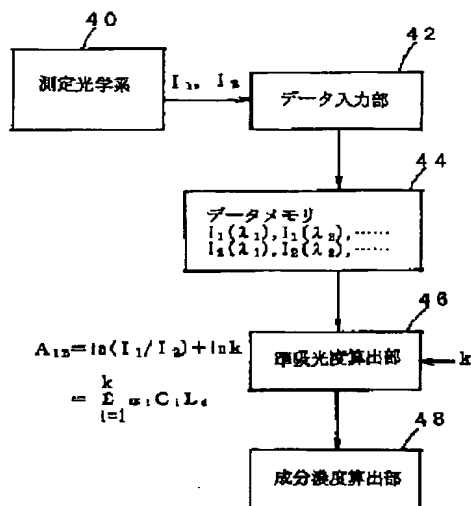
(57) Abstract:

PURPOSE: To measure the concentration of each component contained in a material to be measured by compensating errors resulting from the refractive index differences between air, a cell, and the material.

CONSTITUTION: A measuring optical system 40 is provided with a cell having two different cell lengths, light source section which emits measuring light to be made incident to the two cell length sections of the cell, and photodetecting section which detects light rays transmitted through the cell length sections. A data memory 44 stores the intensity signals of the light rays transmitted through the cell length sections of the cell detected by the photodetecting section as data. A data inputting section 42 converts the intensity signals detected by the photodetecting section into digital signals and stores the digital signals in the memory 44 at every cell length section. A quasi-absorbance calculating section 46 finds the quasi-absorbance corresponding to the concentration of each component by calculating the intensity ratio of the light transmitted through one cell length section to that of the light transmitted through the other cell length section stored in the memory 44. A component concentration calculating

section 48 calculates the concentration of each component by performing multivariate analysis by using quasi-absorbance at a plurality of wavelengths.

COPYRIGHT: (C)1995,JPO



(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平7-306139

(43) 公開日 平成7年(1995)11月21日

(51) Int.Cl.⁶

識別記号

庁内整理番号

F I

技術表示箇所

G 0 1 N 21/59

Z

15/06

C

21/03

Z

審査請求 未請求 請求項の数11 F D (全 11 頁)

(21) 出願番号

特願平6-123052

(22) 出願日

平成6年(1994)5月11日

(71) 出願人 000141897

株式会社京都第一科学

京都府京都市南区東九条西明田町57番地

(72) 発明者 久保 博子

京都府京都市南区東九条西明田町57番地

株式会社京都第一科学内

(72) 発明者 徐 可欣

京都府京都市南区東九条西明田町57番地

株式会社京都第一科学内

(72) 発明者 上野山 晴三

京都府京都市南区東九条西明田町57番地

株式会社京都第一科学内

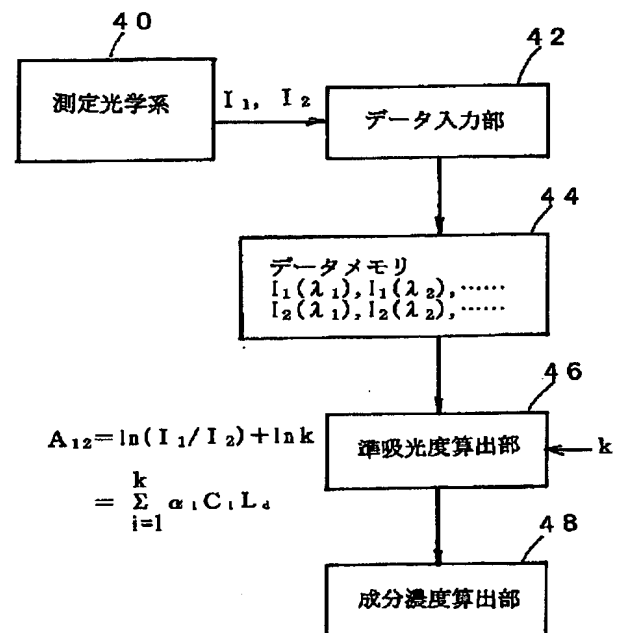
(74) 代理人 弁理士 野口 繁雄

(54) 【発明の名称】 液体試料の成分濃度等を測定する方法及び装置

(57) 【要約】

【目的】 空気、セル、被測定物質の屈折率の相違に起因する誤差をも補償して、成分濃度を測定する。

【構成】 測定光学系40は異なる2つのセル長をもつセル、そのセルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させる光源部、及びセルのそれぞれのセル長部分の透過光を検出する光検出部を備えている。データメモリ44は測定光学系40の光検出部による透過光強度検出信号をデータとして記憶する。データ入力部42は光検出部による透過光強度検出信号をデジタル信号に変換し、セルのそれぞれのセル長部分ごとにデータメモリ44に記憶させる。準吸光度算出部46はデータメモリ44に記憶されたそれぞれのセル長部分の透過光強度比を算出して成分濃度に対応する準吸光度を求める。成分濃度算出部48は複数波長での準吸光度を用い、多変量解析演算を行なって試料の各成分濃度を算出する。



【特許請求の範囲】

【請求項1】 異なる2つのセル長をもつセルに液体試料を入れ、同セルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させ、それぞれの透過光強度の比を求めて、これをその試料の光学的測定量とする測定方法。

【請求項2】 異なる2つのセル長をもつセルに液体試料を入れ、同セルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させ、それぞれの透過光強度の比を複数の測定波長について求め、多変量解析演算を行なって試料の各成分濃度を算出する成分濃度測定方法。

【請求項3】 異なる2つのセル長をもつセル、そのセルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させる光源部、及び前記セルのそれぞれのセル長部分の透過光を検出する光検出部を備えた測定光学系と、前記光検出部による透過光強度検出信号をデータとして記憶するデータメモリと、前記光検出部による透過光強度検出信号をデジタル信号に変換し、前記セルのそれぞれのセル長部分ごとに前記データメモリに記憶させるデータ入力部と、前記データメモリに記憶されたそれぞれのセル長部分の透過光強度比を算出して成分濃度に対応する準吸光度を求める準吸光度算出部とを備えたことを特徴とする測定装置。

【請求項4】 前記測定光学系は測定光の波長を複数の波長にわたって変化させるものであり、前記準吸光度算出部は各測定波長ごとに準吸光度を算出するものである請求項3に記載の測定装置。

【請求項5】 前記測定光学系の光源部は、多波長光を発生する光源、その光源からの光を前記セルの2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束にする平行光学系、前記平行光束から測定光を前記セルのそれぞれのセル長部分へ入射させるスリット機構、及び前記セルへの入射光又は前記セルからの透過光の波長を選択し、かつ変化させる分光手段を備えている請求項4に記載の測定装置。

【請求項6】 前記測定光学系の光源部は、選択された波長の光を発生し、かつその波長を変化させる光源、その光源からの光を前記セルの2つのセル長部分を同時*

$$\log \{I_o(\lambda) / I(\lambda)\} = \epsilon(\lambda) \times C \times L \quad \cdots \cdots (1)$$

$I_o(\lambda)$: セルへの入射光強度

$I(\lambda)$: セルを透過した測定光の強度

$\epsilon(\lambda)$: 成分の吸光係数 (波長に依存する)

C : 溶液中の成分濃度

L : セル長

(1)式から、波長走査の間中、溶液の濃度 C と光路長 L が変らなければ、 I_o と I を測定することにより、その物質に固有の吸光係数に比例した形のスペクトルを得ることができる。

【0003】

【発明が解決しようとする課題】 吸収測定において、試

*に照射する大きさの平行光束にする平行光学系、及び前記平行光束から測定光を前記セルのそれぞれのセル長部分へ入射させるスリット機構を備えている請求項4に記載の測定装置。

【請求項7】 前記測定光学系の光源部は、ビーム状の多波長光を発生する光源、その光源からの光を前記セルの2つのセル長部分に切り換えて入射させる光走査機構、及び前記セルへの入射光又は前記セルからの透過光の波長を選択し、かつ変化させる分光手段を備えている請求項4に記載の測定装置。

【請求項8】 前記測定光学系の光源部は、選択された波長の光を発生し、かつその波長を変化させる光源、及びその光源からの光を前記セルの2つのセル長部分に切り換えて入射させる光走査機構を備えている請求項4に記載の測定装置。

【請求項9】 前記光検出部は、1つの光センサ、前記セルの2つのセル長部分からの透過光をともに集光して前記光センサへ入射させる集光レンズ、及び前記セルの2つのセル長部分からの透過光が前記センサへ入射するのを切り換える切換え手段を備えている請求項5又は6に記載の測定装置。

【請求項10】 前記光検出部は、1つの光センサ、及び前記セルの2つのセル長部分からの透過光をともに集光して前記光センサへ入射させる集光レンズを備えている請求項7又は8に記載の測定装置。

【請求項11】 前記検出部は、前記セルのそれぞれのセル長部分の透過光光路上に設けられたそれぞれの光センサを備えている請求項3又は4に記載の測定装置。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【産業上の利用分野】 本発明は尿や血液を初めとして各種液体試料の光学的測定量、又はさらにそれをもとに成分濃度分析などを行なうための方法とその測定装置に関するものである。

【0002】

【従来の技術】 吸光度測定にはランバート・ベアの法則が用いられる。理想的な状態のランバートベア法則の吸収方程式は次の(1)式のように示される。

料を入れる容器として石英などのセルを用いる場合、図1に示されるように、セル2と空気との界面、及びセル2と溶液2aとの界面で光が反射し、透過光強度 I に影響が現われる。セルと空気との間での反射は空気とセルの屈折率だけに関係し、溶液の濃度には依存しない。しかし、セルと溶液界面での反射は溶液の屈折率に関係し、溶液の濃度が異なると変化する。そのため、屈折が透過率変化を介して透過光強度へ与える影響を修正する必要がある。

【0004】 そこで、屈折による透過率変化を介して透過光強度が変化する点を考慮すると、透過光強度 I は、

ランバート・ベアの吸収方程式から次の(2)式のように* *に表わされる。

$$I = I_0 \cdot t(n_0, n_c, n) \exp(-\sum \alpha_i C_i L) \quad (2)$$

α_i : 溶液中の成分の吸収係数(波長に依存する)

C_i : 溶液中の成分濃度

$t(n_0, n_c, n)$: 透過率で、フレネルの公式により表わされる。

n_0 : 大気の屈折率

n : 溶液の屈折率(波長に依存する)

n_c : セルの屈折率

つまり、大気、セル及び溶液の間で屈折率が相違するため、波長によって透過率 t が変化して透過光強度 I が変化し、それが吸光度に影響する結果、成分濃度の測定結果には透過率変化に起因する誤差が入り込む。

【0005】入射光強度 I_0 を補正する方法は各種考案されている。例えば、(1)同一セルに水などの参照物質を入れて測定する、(2)光源光の一部をセルを通さずにモニタする、などが行なわれているが、屈折率の相違による誤差までは補償されていない。

【0006】また、屈折による透過率変化の透過光強度への影響は、セル長 L を長くすると相対的に小さくな ※20

$$I_1 = I_{01} t_1(n_0, n_c, n) \exp(-\sum \alpha_{i1} C_{i1} L_1) \quad (3)$$

$$I_2 = I_{02} t_2(n_0, n_c, n) \exp(-\sum \alpha_{i2} C_{i2} L_2) \quad (4)$$

【0009】この場合、本光学系の特徴より、

$$I_{01} = I_0$$

$$I_{02} = k I_0$$

ここで、 k はセル長 L_1 、 L_2 部分の入射光強度の倍数を表わす係数で、常数である。この k は水や空気など吸収のない試料を用いて各セル長 L_1 、 L_2 部分での I_{01} と

I_{02} を測定し、

$$k = I_{02} / I_{01}$$

★30

$$I_1 = I_0 t \exp(-\sum \alpha_i C_i L_1) \quad (5)$$

$$I_2 = k I_0 t \exp(-\sum \alpha_i C_i L_2) \quad (6)$$

さらに、セル長 L_1 、 L_2 部分の透過光強度の比をとり

$$I_d = I_1 / I_2$$

とすれば、式(5)と(6)より透過率 t が消去できるため、反射の影響を除去できる。すなわち、

$$I_d = I_1 / I_2$$

$$= (1/k) \exp(-\sum \alpha_i C_i (L_1 - L_2))$$

$$= (1/k) \exp(-\sum \alpha_i C_i L_d)$$

である。ここで、

$$L_d = L_1 - L_2$$

とした。 I_d の式の自然対数を求めることにより、次の(7)式で与えられる量 A_{12} が得られる。

$$A_{12} = \ln(I_1 / I_2) + \ln k$$

$$= -\sum \alpha_i C_i L_d \quad (7)$$

【0010】この A_{12} は、透過率 t の影響が除かれており、吸光度の次元をもつ量である。本発明では、この A_{12} を本来の吸光度に準ずるものとして準吸光度と呼ぶ。準吸光度 A_{12} を用いると、式(7)に示されるように、2つのセル長 L_1 と L_2 をもつセルを用いて測定したそれ

※り、吸収測定の精度を高くすることができる。しかし、セル長を長くすると透過光強度が小さくなり、 S/N 比が悪くなる。

【0007】本発明の第1の目的は、セル長を長くすることなく、空気、セル、被測定物質の屈折率の相違に起因する誤差をも補償して、成分濃度に対応した光学的測定量としての準吸光度を測定する簡便な方法及び装置を提供することである。本発明の第2の目的は、その準吸光度をもとにして成分濃度を求める方法及び装置を提供することである。

【0008】

【課題を解決するための手段】屈折率の透過率への影響を考慮した理論式は、式(2)に示した通りである。そこで、図2に示されるような2つのセル長 L_1 と L_2 をもつセル2に試料を入れ、それぞれのセル長部分に測定光を入射させてその透過光強度 I_1 と I_2 を検出するものとする。式(2)を次のように展開する。

★として求めておく。また、セル2には同じ被測定試料が入っているので、

$$t_1(n_0, n_c, n) = t_2(n_0, n_c, n) = t$$

$$\alpha_{i1} = \alpha_{i2} = \alpha_i$$

$$C_{i1} = C_{i2} = C_i$$

である。よって、式(3)と(4)は次の式(5)と(6)のように表わすことができる。

それぞれのセル長部分での透過光強度 I_1 、 I_2 と係数 k により、入射光強度 I_0 、屈折率 n 、 n_0 、 n_c に全く影響されることなく、成分濃度 C_i に依存する光学的測定量を求めることができる。

【0011】本発明はこのように、異なる2つのセル長をもつセルを用いてそれぞれのセル長部分での透過光強度を測定し、その比をとって処理することにより、屈折が透過率変化を介して透過光強度へ与える影響を除去して成分濃度に依存した光学的測定量としての準吸光度を求める方法と装置である。

【0012】本発明で成分濃度を求めるには、複数の測定波長について準吸光度を求め、その準吸光度を用いて多変量解析演算を行なって試料の各成分濃度を算出する。図1に本発明の測定装置を概略的に表わす。測定光学系(40)は異なる2つのセル長をもつセル、そのセルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させる光源部、及びセルのそれぞれのセル長部分の透過光を検出する光検出部を備えている。データメモリ(44)は測定

光学系(40)の光検出部による透過光強度検出信号をデータとして記憶する。データ入力部(42)は光検出部による透過光強度検出信号をデジタル信号に変換し、セルのそれぞれのセル長部分ごとにデータメモリ(44)に記憶させる。準吸光度算出部(46)はデータメモリ(44)に記憶されたそれぞれのセル長部分の透過光強度比を算出して成分濃度に対応する準吸光度を求める。

【0013】成分濃度まで求めるときは、測定が複数波長にわたって行なわれ、準吸光度算出部(46)は測定波長ごとに準吸光度を求める。成分濃度算出部(48)はその複数波長での準吸光度を用い、多変量解析演算を行なって試料の各成分濃度を算出する。

【0014】異なる2つのセル長をもつセルのそれぞれのセル長部分に測定光を入射させ、セルのそれぞれのセル長部分の透過光を検出する測定光学系は、単一の波長について測定を行なうものであるとすることもできるが、成分濃度を算出するには測定光の波長を複数の波長にわたって変化させる必要がある。測定光の波長を複数の波長にわたって変化させようようにした測定光学系の光源部の態様は次のようなものである。

【0015】第1の態様は、図4のように、多波長光を発生する光源、その光源からの光をセルの2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束にする平行光学系、その平行光束から測定光をセルのそれぞれのセル長部分へ入射させるスリット機構、及びセルへの入射光又はセルからの透過光の波長を選択し、かつ変化させうる分光手段を備えているものである。

【0016】第2の態様は、これも図4のように、選択された波長の光を発生し、かつその波長を変化させうる光源、その光源からの光をセルの2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束にする平行光学系、及びその平行光束から測定光をセルのそれぞれのセル長部分へ入射させるスリット機構を備えているものである。

【0017】第3の態様は、図5のように、ビーム状の多波長光を発生する光源、その光源からの光をセルの2つのセル長部分に切り換えて入射させる光走査機構、及びセルへの入射光又はセルからの透過光の波長を選択し、かつ変化させうる分光手段を備えているものである。

【0018】第4の態様は、図6のように、選択された波長の光を発生し、かつその波長を変化させうる光源、及びその光源からの光をセルの2つのセル長部分に切り換えて入射させる光走査機構を備えているものである。これらの態様の光源部において、光源として単一波長の光のみを発生するものを用いたり、分光手段で選択波長を変化させないようにすれば、単一波長での測定となる。

【0019】セルのそれぞれのセル長部分の透過光を検出する光検出部の態様は次のようなものである。第1の

態様は、光走査機構の光源部が光源からの光を平行光学系によりセルの2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束にし、スリット機構によりその平行光束から測定光をセルのそれぞれのセル長部分へ入射させるものと組み合わせられるものであり、1つの光センサ、セルの2つのセル長部分からの透過光とともに集光してその光センサへ入射させる集光レンズ、及びセルの2つのセル長部分からの透過光がその光センサへ入射するのを切り換える切換え手段を備えている光検出部である。

【0020】第2の態様は、光源からの光をセルの2つのセル長部分に切り換えて入射させる光走査機構を備えた測定光学系と組み合わせられるものであり、1つの光センサ、及びセルの2つのセル長部分からの透過光とともに集光してその光センサへ入射させる集光レンズを備えている光検出部である。第3の態様は、セルのそれぞれのセル長部分の透過光光路上に設けられたそれぞれの光センサを備えている光検出部である。

【0021】

【作用】式(7)で与えられる準吸光度は、屈折率に起因する誤差要因が除かれているため、高精度の成分濃度分析が可能になる。成分濃度に依存する準吸光度 A_{12} をもとにして成分濃度を算出する成分濃度算出部48の動作を説明する。

【0022】(7)式から、成分濃度に依存する準吸光度 A_{12} は

$$A_{12} = -\sum \alpha_i C_i L d$$

であり、未知変数は C_i ($i=1, 2, \dots, K$; K は成分数)であるので、 K 個の独立な波長で準吸光度を測定し、連立方程式を解けば各成分の濃度を算出することができる。主成分回帰分析法(PCR法)や部分最小二乗法(PLS法)などの多変量回帰分析法を用いてデータ解析を行えば、濃度をより高精度に求めることができる。

【0023】多変量回帰分析法では、一度に多くの準吸光度情報を用いて回帰分析することができるので、単回帰分析に比べて高い精度の定量分析が可能である。重回帰分析は最も多用されているが、多数の試料が必要であり、各波長の準吸光度値どうしの相関が高い場合にはその定量分析精度は非常に低くなる。一方、多変量回帰分析法である主成分回帰分析法は多波長の準吸光度情報を互いに無相関な主成分に集約させることができ、さらに不必要なノイズデータを削除することができるので、高い定量分析精度が得られる。また部分最小二乗法は主成分の抽出の際に試料濃度のデータも利用することができるので、主成分回帰分析法と同様に高い定量分析精度を得ることができる。

【0024】例えば、測定しようとする各試料成分についてその単成分水溶液の可視又は近赤外の波長領域での濃度と準吸光度との間の相関係数の絶対値が0.5以上、好ましくは0.9以上の波長をその成分固有の測定

波長として選択し、試料溶液に対し可視光又は近赤外光を照射し、測定しようとする複数の各成分についてそれぞれ前記の条件で選択された測定波長での準吸光度を測定することにより、多変量回帰分析法により複数の試料成分を同時に定量分析することができる。波長 λ_j での準吸光度 A_{12} と濃度との相関係数 R_j は次の式により与えられる。

【0025】

【数1】

$$R_j = \frac{(m-1) \sum_{i=1}^m (A_{12ij} - \overline{A_{12j}})(C_i - \overline{C})}{\sum_{i=1}^m (A_{12ij} - \overline{A_{12j}})^2 \cdot \sum_{i=1}^m (C_i - \overline{C})^2} \quad 10$$

ただし、 m ：サンプル数

$$\overline{A_{12j}} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m A_{12ij}$$

$$\overline{C} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m C_i$$

【0026】

【実施例】図4は第1の実施例を表わす。光源1はハロゲンランプのように複数の波長を同時に発生する光源である。光源1から発生した光は、集光レンズ4によってセル2の2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束にされる。セル2は2つのセル長 L_1 と L_2 を併せもっており、試料溶液が入れられる。セル2と集光レンズ4の間には測定光の平行光束を維持したままで波長を選択する分光手段としてフィルタロータ6が配置されており、フィルタロータ6にはセル2の2つのセル長部分を同時に照射する大きさの平行光束を透過させる大きさを持ち、透過波長の異なる複数の干渉フィルタ5が設けられている。さらに、フィルタロータ6とセル2の間には、セル2の2つのセル長部分に測定光を入射させるためのスリット7が配置されている。

【0027】セル2の2つのセル長部分を透過した透過光を検出するために光電子増倍管やフォトダイオードなどのセンサ3が設けられており、セル2の2つのセル長部分を透過した透過光をともにセンサ3へ集光して入射させるために集光レンズ9がセル2とセンサ3の間に配置されている。セル2と集光レンズ9の間には、セル2の各セル長部分を透過した透過光を高速に交互に切り換えて通過させるためにシャッタ8が配置されている。

【0028】10はデータ処理部であり、センサ3からの電気信号を各セル長部分ごと及び各波長ごとの信号に分離し、A/D変換によりデジタル信号に変換する入出力ポート16を初め、CPU12、ROM13、RAM14、磁気記憶装置などの記憶媒体15を含んでいる。11は結果出力部としてのレコーダである。

【0029】図3におけるデータ入力部42、データメ

モリ44、準吸光度算出部46及び成分濃度算出部48はデータ処理部10により実現されている。データ処理部10はまた、光源1の点灯、フィルタロータ6の回転による波長切換え、シャッタ8の動作による2つのセル長部分の透過光の取込みの切換えも制御している。

【0030】図4は測定光がセル2に入射する前に波長が選択される前分光方式であるが、セル2を透過した測定光を分光する後分光方式とすることもできる。図5は後分光方式の例を示したものである。図5において、図4におけるフィルタロータ6に代えて、セル2を透過した測定光を集光する集光レンズ9とセンサ3の間に分光装置20が配置されている。分光装置20は図4と同じフィルタロータ6であつてもよく、回折格子を用いた分光器であつてもよい。

【0031】図6は他の実施例を表わしたものである。2つのセル長をもつセル2のそれぞれのセル長部分に測定光を入射させるために、一定速度で回転するポリゴンミラー17が用いられている。光源1aは複数の波長から選択された1つの波長光を発生し、かつ複数の波長に変化させることができるものである。このような光源1aとしてはレーザダイオードアレイ、可変波長レーザ、又は多波長を発生する光源と分光器との組合わせなどである。光源1aからの測定光はポリゴンミラー17で反射され、ポリゴンミラー17が回転することにより光の入射角度が変えられる。ポリゴンミラー17は一定速度で高速に回転して、セル2のそれぞれのセル長部分へ入射する測定光の反射角度を切り換える。ポリゴンミラー17で反射されその反射角度が変えられてセル2に入射する各測定光を互いに平行な光束としてセル2に入射させるために、ポリゴンミラー17からの反射光を受光する集光レンズ18が設けられている。セル2のそれぞれのセル長部分を透過した測定光は集光レンズ19によりセンサ13へ入射させられる。データ処理部10は図4のものと同じであり、データ処理部10はポリゴンミラー17の回転、光源1aの点灯、波長選択及び切換えも制御する。

【0032】図6の実施例において、光源を図4、5の実施例のようにハロゲンランプのように複数の波長を同時に発生する光源1とし、測定光がセル2に入射する前又はセル2を透過した後に分光し、その分光した波長を変化させるようにしてもよい。また、図4又は図5の実施例において、光源を図6の実施例のように、レーザダイオードアレイ、可変波長レーザ、又は多波長を発生する光源と分光器との組合わせなど、複数の波長から選択された1つの波長光を発生し、かつ複数の波長に変化させることができるものとし、フィルタロータ6や分光装置20を省くようにしてもよい。

【0033】図4から図6までの実施例では、センサ3は1個であり、セル2のそれぞれのセル長部分を透過した測定光を集光レンズでセンサ3に入射させている。そ

れに対し、図7の実施例はセル2のそれぞれのセル長部分の透過光の光路上にセンサ3-1と3-2をそれぞれ設けたものである。この場合、センサは2つ必要になるが、集光レンズ9、19が不要になる。

【0034】図8はデータ処理部10をさらに具体的に示したものである。入出力ポート16は、センサ3の出力を増幅するアンプ21、アンプ21の出力信号をデジタル信号に変換するA/D変換器22、入力ポート23、入力データバッファ24、入力ポート31、出力ポート32、センサ制御部28、I/O制御部29及び光源制御部30を含んでいる。データ処理部10にはさらに表示部25、操作部26、外部入出力インターフェース27が備えられている。

【0035】図4又は図5の実施例を用い、準吸光度を求め、さらに成分濃度を求める処理の流れを図9のフローチャートにより説明する。データ処理部の電源をオンにすると、全体の制御部の電源がオンになり、データ処理部にあるマイクロコンピュータ部分が初期化され、CPUやROMなどが初期設定される。マイクロコンピュータ動作が可能になった後、記憶媒体から測定と装置動作に関する初期値データが読み込まれてRAMへ書き込まれる。このデータをもとに装置の初期設定作業が行なわれ、フィルタロータ6又は分光器20が初期位置に設定され、測定の開始を待つ。

【0036】試料がセル2に注入され、所定の場所にセットされる。スタートボタンが押されると測定動作が開始される。光源1から照射された光が集光レンズ4によって平行光束とされ、スリット7を経てセル2のそれぞれのセル長部分に入射する。図4の実施例ではセル2に入射する測定光の波長がフィルタロータ6の干渉フィルタ5により選択され、図5の実施例ではセル2を透過した測定光の波長が分光装置20により選択される。

【0037】セル2の各セル長部分を透過した光の光路がシャッタ8で高速に交互に切り換えられる。まず、シャッタ1が開けられ、第1のセル長部分を透過した透過光が取り込まれ、A/D変換されて透過光強度 $I_1(\lambda)$ が入力される。次に、シャッタ8の第1のセル長部分のシャッタが閉じられ、第2のセル長部分のシャッタが開けられて、第2のセル長部分の透過光が取り込まれ、A/D変換されて透過光強度 I_2 が入力される。

【0038】その後、図4ではフィルタロータ6が回転させられ、図5では分光装置20が走査されて次の測定波長に切り換えられる。その後、同様にしてその測定波長で第1のセル長部分と第2のセル長部分の透過光が順次取り込まれてA/D変換される。測定予定の波長にわたって2つのセル長部分の透過光強度が入力されると、データ処理部10では各波長ごとに準吸光度が算出され、多変量解析演算を用いて成分濃度が算出される。その結果はレコーダ11などに出力される。最後にデータ処理部の電源がオフにされて測定が終了する。

【0039】図6の実施例を用い、準吸光度及びさらに成分濃度を求める動作を図10のフローチャートにより説明する。データ処理部の電源がオンにされ、データ処理部が初期化され、CPUやROMなどが初期設定された後、試料がセル2に注入され、所定の場所にセットされてスタートボタンが押され、測定動作が開始されると、ポリゴンミラー17が回転を開始する。ポリゴンミラー17は一定速度で高速に回転し、ポリゴンミラー17の回転位置はポリゴンミラー17を回転させるための制御信号によりデータ処理部10で監視されている。ポリゴンミラー17がセル2の第1のセル長部分へ測定光を入射させる位置へ移動した時点で、センサ3の検出信号がA/D変換されて透過光強度 $I_1(\lambda)$ が入力される。ポリゴンミラー17が第2のセル長部分へ測定光を入射させる位置へ移動した時点で、セル3の検出信号がA/D変換されて透過光強度 $I_2(\lambda)$ が入力される。

【0040】次に、光源1aにより次の測定波長へ切り換えられ、同様にセル2のそれぞれのセル長部分の透過光強度が順次入力される。予定の測定波長でのデータ入力が終了すると、図9と同様に、準吸光度が算出され、多変量解析演算により成分濃度が算出されて出力され、測定が終了する。

【0041】図11は図7の実施例でセンサをそれぞれの透過光光路上に配置し、図4の光源部と組み合わせた場合の動作を示すフローチャート図である。装置の初期設定作業は先の実施例と同じであり、測定が開始されると一方のセンサ3-1の信号が取り込まれ、A/D変換されて透過光強度 $I_1(\lambda)$ が入力される。続いてセンサ3-2の信号が取り込まれ、A/D変換されて透過光強度 $I_2(\lambda)$ が入力される。次に、測定波長が切り換えられ、同様にセンサ3-1と3-2の検出信号が交互にデータとして取り込まれていく。予定の測定波長での両センサ3-1、3-2の信号の入力が終了すると、先の実施例と同様に準吸光度が算出され、それを用いて多変量解析演算により成分濃度が算出され、その結果が出力されて測定が終了する。

【0042】

【発明の効果】本発明では異なるセル長を併せもつセルを用いて両セル長部分からの透過光強度を測定し、その両透過光強度の比をとって準吸光度を算出するようにしたので、屈折が透過率変化を介して透過光強度へ与える影響を除くことができ、高精度な吸収測定を行なうことができる。さらに成分濃度分析を行なうときは、準吸光度に基づいて高精度な成分濃度分析を行なうことができる。

【図面の簡単な説明】

【図1】2つのセル長 L_1 、 L_2 をもつセルを示す概略平面図である。

【図2】セルに照射される光の透過と反射を示す概略正面断面図である。

11

【図 3】 本発明を概略的に示すブロック図である。
 【図 4】 第 1 の実施例を示す概略構成図である。
 【図 5】 第 2 の実施例を示す概略構成図である。
 【図 6】 第 3 の実施例を示す概略構成図である。
 【図 7】 第 4 の実施例におけるセルとセンサ及びデータ処理部を示すブロック図である。
 【図 8】 一実施例におけるデータ処理部を示すブロック図である。
 【図 9】 図 4 及び図 5 の実施例の動作を示すフローチャート図である。
 【図 10】 図 6 の実施例の動作を示すフローチャート図である。
 【図 11】 図 7 の実施例の動作を示すフローチャート図である。

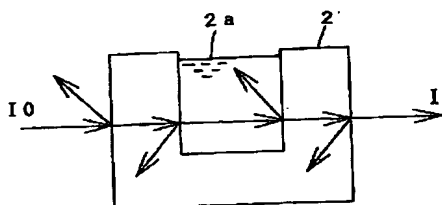
*

12

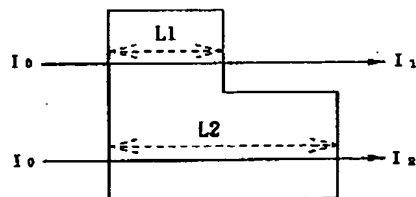
* 【符号の説明】

- 1, 1 a 光源
 2 セル
 3, 3-1, 3-2 センサ
 4 集光レンズ
 5 干渉フィルタ
 6 フィルタロータ
 10 データ処理部
 40 測定光学系
 10 42 データ入力部
 44 データメモリ
 46 準吸光度算出部
 48 成分濃度算出部

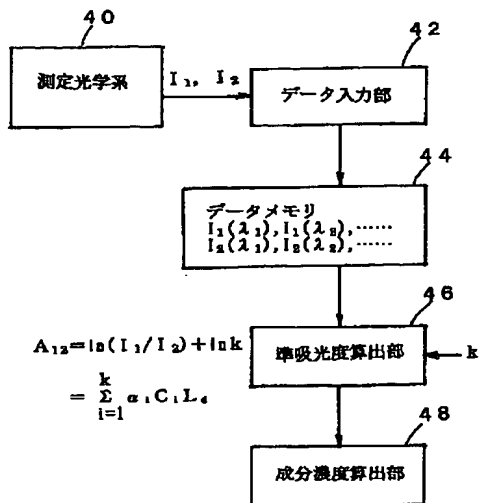
【図 1】



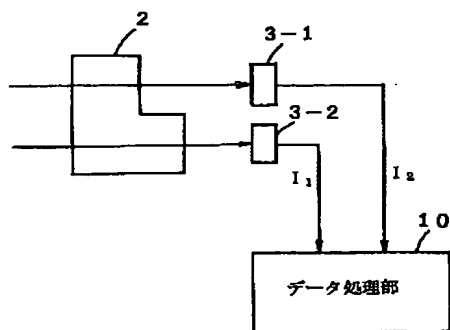
【図 2】



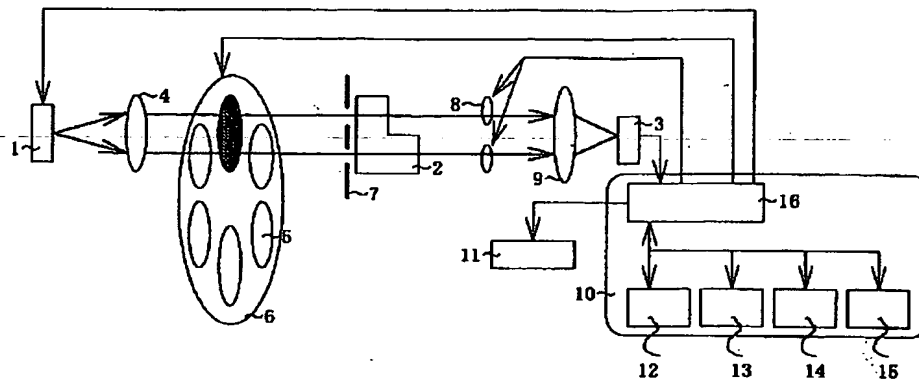
【図 3】



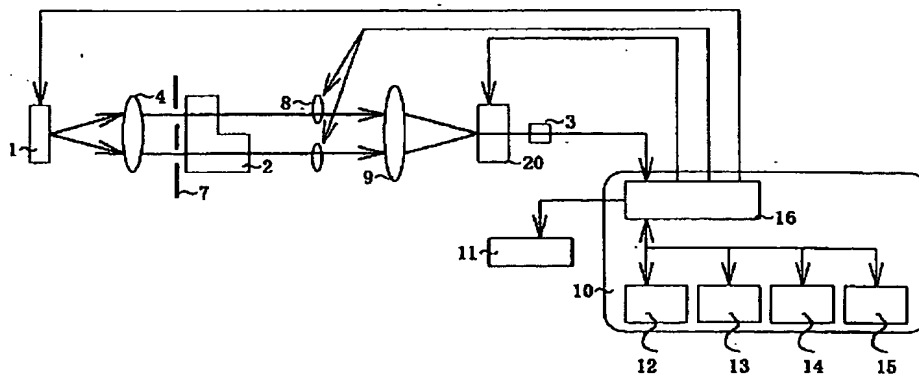
【図 7】



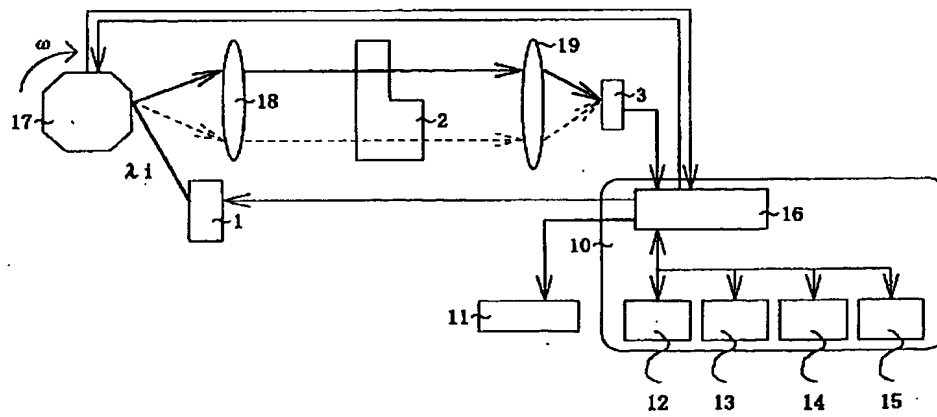
【図 4】



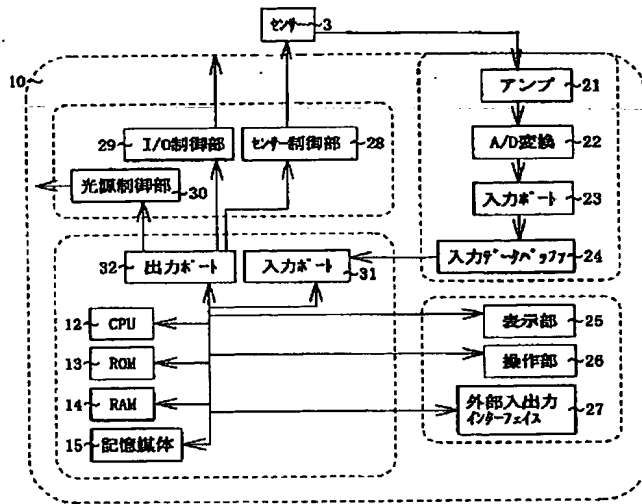
【図 5】



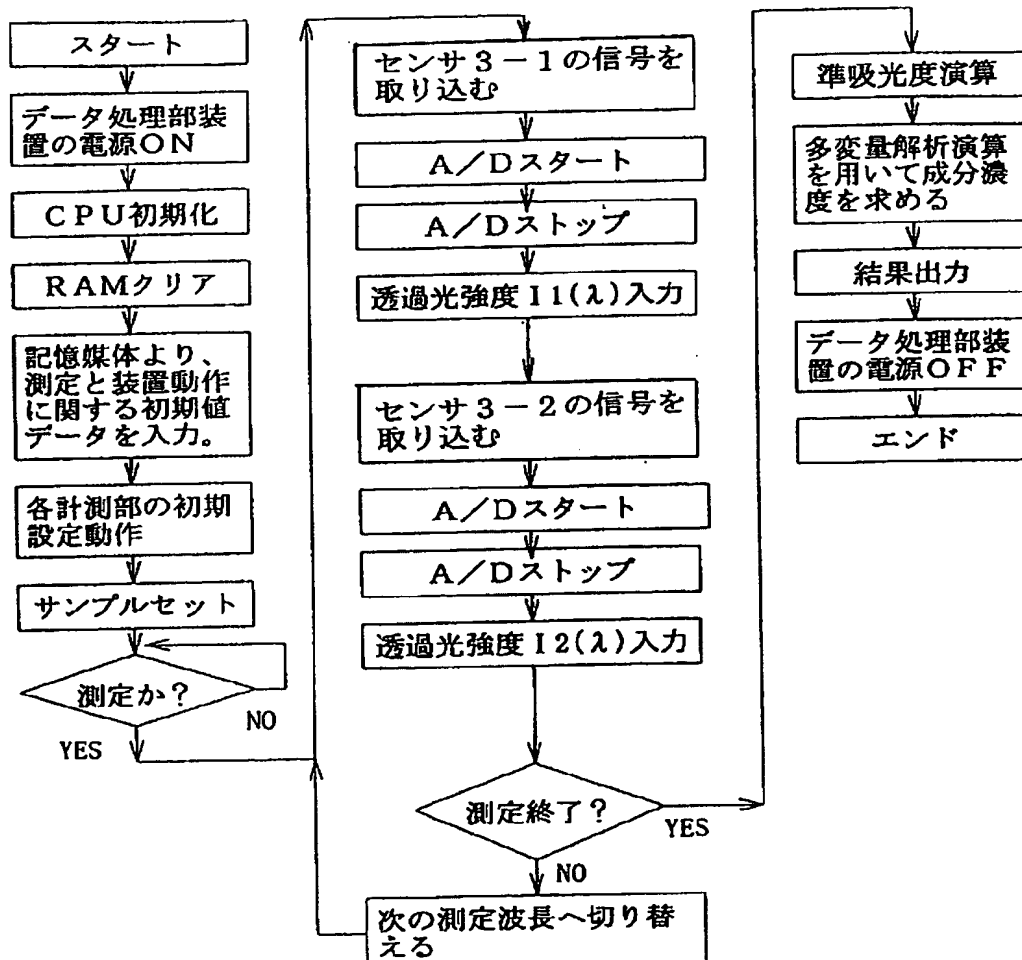
【図 6】



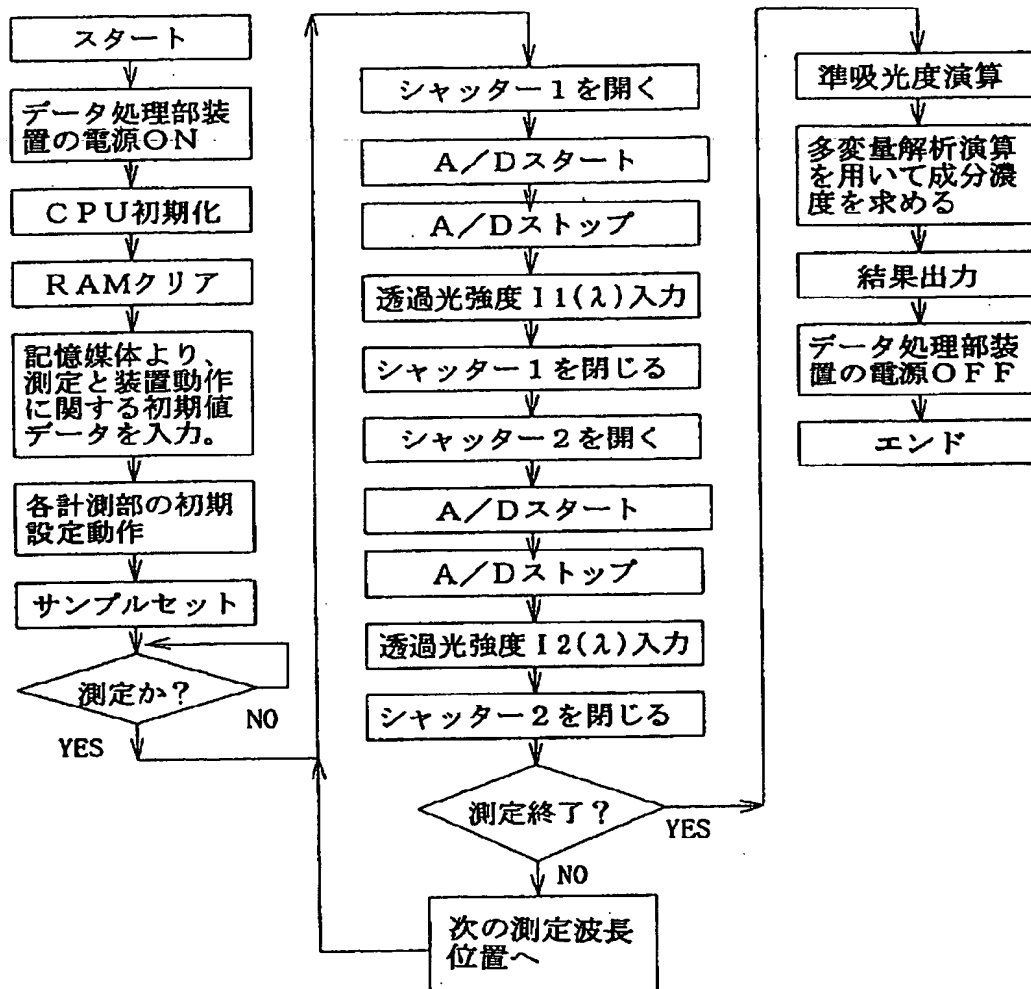
【図 8】



【図 11】



【図 9】



【図10】

